C H

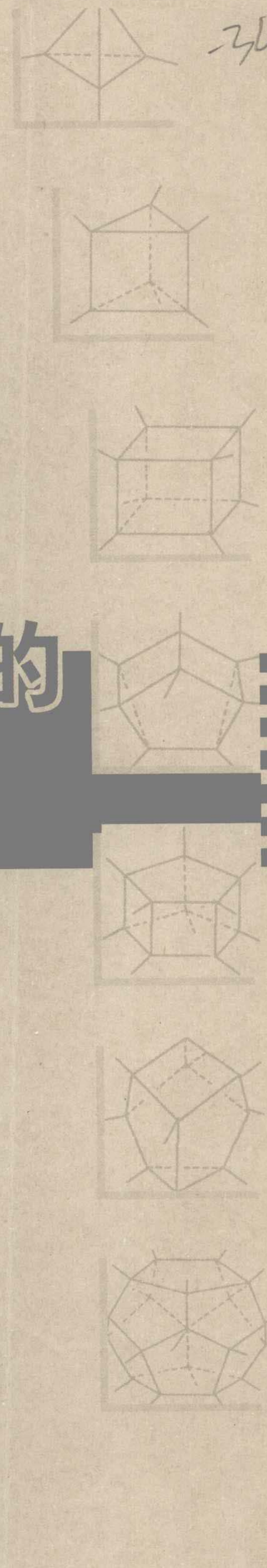
唐敖庆

理论化学中的群论方法

唐敖庆

理论化学中的群论方法

（李伯符 郭纯孝 整理）



图书在版编目（CIP）数据

理论化学中的群论方法/名唐敖庆编著．一长春：吉林大学出版社，2003．9

ISBN 7—5601—3017—8

Ⅰ．理… Ⅱ．唐… Ⅲ．群论—应用—物理化学 Ⅳ．064

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2003）第 007420 号

理论化学中的群论方法

唐 敖 庆

责任编辑、责任校对：赵洪波　　封面设计：孙　群

吉林大学出版社出版（长春市明德路 3 号）　　吉林大学出版社发行　　吉林农业大学印刷厂印刷

开本：787×1092 毫米 1/16　　2003 年 9 月第 1 版

印张：41.25　　2003 年 9 月第 1 次印刷

字数：953 千字　　印数：1—500 册

ISBN 7—5601—3017—8 / O・283　　定价：88.00 元

序

1999年由吉林大学郭纯孝教授建议总结、整理、出版唐敖庆院士教学成果。经吉林大学党委研究成立了“总结唐敖庆教授教学思想并出版讲课文稿”研究组。由吉林大学理论化学计算国家重点实验室承担这项工作，并先后得到教育部高教司和国家自然科学基金委员会的支持。

1963年原高教部委托唐敖庆院士在吉林大学举办“物质结构讨论班”，为期三年。唐敖庆院士在讨论班上，根据国内理论化学科研和教学的需要，系统地讲述了有关群论的理论方法和应用。经过研究组讨论，认为总结、整理唐敖庆院士在这方面的教学成果有重要的意义。由李伯符教授承担这项工作，郭纯孝教授辅助做这项工作。

福州物质结构研究所刘春万教授和吉林大学裘祖文教授提供了当年唐敖庆院士讲课时所记的笔记。经过研究，认为重点选择唐敖庆院士讲课若干主要内容加以整理可能是适当的（例如，有关置换群和连续群的特征标方面涉及的很少），为了适当地反映唐敖庆院士所领导的科研集体在群论应用方面的某些研究成果，在分子的不可约张量方法方面有所补充。本书的初稿先后送给鄢国森教授、刘春万教授、李前树教授、吴兆颜教授、朱诚久教授和于微舟教授进行审阅，在听取了这些专家的意见后又经过三次修改，最后定稿为“理论化学中的群论方法”。唐敖庆院士由于健康原因没有对本书稿进行过审阅。因此，书中难免有疏漏、缺点，甚至错误，恳请读者提出宝贵意见。

向审阅本书初稿的各位专家表示衷心的感谢，也向教育部高教司、国家自然科学基金委员会的支持表示衷心的感谢。

孙家钟

2003年9月

目　　录

第一章　有限群理论基础

在这一章中首先讨论有限群理论中的基本概念，以及相关的定理；而后重点讨论有限群表示问题，以及特征标，给出并证明一些重要定理，为以后各章中群的专题研究提供必要的准备. 这一章的内容是学习群论的必要的基础，是进入群论这一数学领域的必由之路. 深刻地理解群，特别是群的表示理论，需要一定的线性代数基础知识，读者必要时可补习一下线性代数的基础知识.

1.1　群

在本节中将讨论群的定义，以及相关的定理. 群(group)是数学中的一个重要概念，它描述内部存在特定联系的元素集合，集合内的元素在数学上是抽象的，但在物理或化学以及其它学科的应用中，这些元素将具有特定的物理意义和几何意义.

定义 1.1.1　令 $G=\{g_1, g_2, \cdots, g_N\}$ 是一元素集合，$g_1, g_2, \cdots, g_N$ 是集合 G 中的元素，在这些元素之间定义一种运算，通常称为乘法. 如果集合 G 中的元素在这种运算下，满足如下 4 个条件，则称集合 G 为一个群. 这 4 个条件是：

（1）如果取集合 G 中任意两个元素 g_i，g_k，它们的乘积 $g_i \cdot g_k = g_l$，g_l 一定也是集合 G 中的一个元素，即：若 g_i，$g_k \in G$，则 $g_i \cdot g_k = g_l \in G$. 这一性质称为封闭性

（2）对于集合 G 中的任意元素 g_i，g_k，g_l，存在关系：

$$(g_i \cdot g_k) \cdot g_l = g_i \cdot (g_k \cdot g_l)$$

即集合内元素在所定义的运算下，遵循结合律.（这也是群内元素间的运算称为乘法的原因，因为所有的乘法都遵循结合律）.

（3）集合 G 中存在一个而且只存在一个元素 g_0，使得对集合内任意元素 g_i 存在关系

$$g_0 \cdot g_i = g_i \cdot g_0 = g_i$$

称这个唯一的元素 g_0 为单位元，一般记为 e.

（4）集合中每个元素 g_i 都存在一个元素 g_i^{-1}，使得

$$g_i \cdot g_i^{-1} = g_i^{-1} \cdot g_i = e$$

称 g_i 与 g_i^{-1} 互为逆元素.

下面举几个简例来说明群的定义.

例 1　全部实数在加法下构成一个群.

实数相加仍然为实数，因而它满足封闭性；加法运算满足结合律，0 为单位元，实数 $(-x)$ 与 x 互为逆元素.

例 2　除去 0 之外的全部实数在乘法下构成一个群.

这个群也是显然的，实数相乘还是实数，满足封闭性；实数乘法符合结合律；1 为单

位元；实数 x 与实数 $1/x$ 互为逆元素. 但是实数 0 与任意实数相乘都不可能为 1，因而 0 没有逆元素存在，所以包括 0 在内的全部实数在乘法下不构成群.

例 3 二维旋转群 R_2.

在三维空间中取任一矢量 $\boldsymbol{R}$，绕 $\boldsymbol{R}$ 的所有转动构成一个群，称为二维旋转群，通常记为 R_2. 绕 $\boldsymbol{R}$ 转动 θ 角，为群 R_2 中的一个元素，记为 $R(\theta)$，两个旋转 $R(\theta_1)$ 和 $R(\theta_2)$ 之间的乘法定义为转动 $R(\theta_1+\theta_2)$，即

$$R(\theta_1)\cdot R(\theta_2) = R(\theta_1+\theta_2)$$

显然这种转动是封闭的，而且遵守结合律，$R(0)=R(2n\pi)$ 为单位元，$R(\theta)$ 与 $R(-\theta)$ 互为逆元素.

定义 1.1.2 设 H 是群 G 的一个子集，若对于群 G 定义的乘法运算，H 也构成一个群，则称 H 为 G 的子群(subgroup)，记为 $H\subset G$.

群 G 的子集 H 构成子群的条件是：若 g_i，$g_j\in H$，则 $g_i\cdot g_j\in H$，若 $g_i\in H$，则 $g_i^{-1}\in H$，H 包括单位元 e.

对于任何群 G，单位元 e 本身为 G 的子群，G 也可认为是 G 本身的子群. 但是这两个子群并没有实质上的意义，一般称为平庸子群或显然子群. 群 G 除了上述平庸子群外的真正子群称为真子群或固有子群.

例 4 前面例 1 所给出的实数群中，取全部整数，它们在加法运算下，仍然为一个群，因而全部整数所构成的加法群为全部实数所构成的加法群的子群.

例 5 C_3 群，保持平面上正三角形不变只有一个轴的转动构成的对称群称为 C_3 群. 它包括绕垂直正三角形平面并通过正三角形中心的轴转 $2\pi/3$，$4\pi/3$ 和 $6\pi/3=2\pi$ 的三个转动，转动 2π 的转动为单位元素. 显然它是 R_2 群的子群.

从前面的例子可看到一个群可包括子群，群的元素可以是连续的无穷多个，如实数群；也可以是分立的无穷多个，如整数群；也可以是有限个，如 C_3 群. 由有限个元素构成的群称为有限群. 有限群所包括的元素数目称为群的阶数.

对于有限群，一般要构造出它们的乘法表，用这种表来描述它们乘法运算的关系. 如 C_3 群只有 3 个元素，即 e，$R(2\pi/3)$，$R(4\pi/3)$，下面列出了它的乘法表：

C_3 的乘法表

R_3	e	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$
e	e	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$
$R(2\pi/3)$	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$	e
$R(4\pi/3)$	$R(4\pi/3)$	e	$R(2\pi/3)$

为了构造和描述群的乘法，有一个重要定理，即重排定理.

定理 1.1.1(重排定理) 令 $G(g_1,g_2,\cdots,g_N)$ 为一个群. 取其中的一个特定元素 $g_k\in G$，它与 G 中任一元素 g_α 之乘积，$g_k\cdot g_\alpha=g_l$ 仍然为 G 中的一个元素，当 α 取遍整个群时，l 也取遍整个群，而且对给定的 g_α，g_l 只出现一次.

证明 首先证明 G 中的任何元素 g_α 都可写为群中一个元素 g_β 与另一个元素 g_γ 之积，即 $g_\alpha=g_\beta\cdot g_\gamma$. 为了证明 g_γ 为群 G 中的元素，只须用 g_β 之逆 g_β^{-1} 乘上前式得到

$$g_\beta^{-1} \cdot g_\alpha = g_\beta^{-1} \cdot g_\beta \cdot g_\gamma = g_\gamma$$

进一步再证明对给定元素 g_α 和 g_β，g_γ 是唯一的，比如还存在元素 $g_{\gamma'}$ 与 g_β 之积也是 g_α，即 $g_\beta \cdot g_\gamma = g_\beta \cdot g_{\gamma'}$. 此时用 g_β^{-1} 乘上式得到 $g_\beta^{-1} \cdot g_\beta \cdot g_\gamma = g_\beta^{-1} \cdot g_\beta \cdot g_\gamma$，于是 $g_\gamma = g_{\gamma'}$，而对一定的元素 g_β，当 g_γ 取不同元素时，就得到了不同的 g_α. 最后就可得到当 g_γ 取遍整个群时，就对一定的 g_β 得到了群的全部元素 g_α，而且每个 g_α 只出现一次. 这就证明了这个定理.

重排定理告诉我们，对有限群可构造一个乘法表，即把 N 个群元素按一定次序排成一行，按相同次序再排成一列，把第 i 行与第 j 列的元素 g_i 和 g_j 之积 $g_i \cdot g_j$ 列入第 i 行与第 j 列交叉之处，于是全部乘法结果就构成了一个 N 行 N 列的乘法表. 在这个表中每一行或每一列都是 N 个群元素的不同排列.

例 6　D_3 群的乘法表.

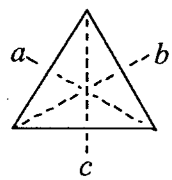
D_3 群是由保持平面上正三角形不变的转动群，它有六个元素，分别为（如下图所示）

e（单位元）：不变；

d：绕垂直正三角形平面并通过三角形重心的轴转 $2\pi/3$ 角度；

f：绕上述轴转 $4\pi/3$；

a，b，c 分别为绕正三角形三个分角线转 π 角的转动.



下面列出了这六个变换操作的乘法表.

D_3 的乘法表

D_3	e	d	f	a	b	c
e	e	d	f	a	b	c
d	d	f	e	c	a	b
f	f	e	d	b	c	a
a	a	b	c	e	d	f
b	b	c	a	f	e	d
c	c	a	b	d	f	e

利用子群可定义群的左陪集和右陪集，陪集（cost）在群论中有着重要的作用.

定义 1.1.3　令 H 是群 G 的子群 $H = \{h_1, h_2, \cdots, h_k\}$，取 G 中一个不属于子群 H 的元素 g，即 $g \in G$，$g \notin H$. 按群的乘法，可由 g 和子群构造出一个元素集合，即

$$gH = \{g \cdot h_1, g \cdot h_2, \cdots, g \cdot h_k\}$$

由于 g 是从左边乘 H，称这个集合为子群 H 的左陪集，同样也可构造出元素集合.

$$Hg = \{h_1 \cdot g, h_2 \cdot g, \cdots, h_k \cdot g\}$$

称 Hg 为子群 H 的右陪集. 由于 $g \in G$，$h_1, \cdots, h_k \in G$，因而陪集中均为群 G 的元素，而 $g \notin H$，$h_1, \cdots, h_k \in H$，因而陪集中的元素均不在子群 H 之中，否则将破坏子群的封闭性. 陪集中元素的数目等于子群 H 内元素的数目，也就是说陪集中元素的数目等于子群的阶数.

定理 1.1.2（陪集定理）　令 H 为 G 的子群，则子群 H 的两个左陪集或者具有完全相同的元素，或者没有任何相同的元素，对右陪集亦然.